

Simulação computacional da interação de íons triflato em interfaces hidrofóbicas

Filipe S. Lima (PG),^{1,*} Dominik Horinek (PQ),² Luís Gustavo Dias (PQ),³ Iolanda M. Cuccovia (PQ),¹ Hernan Chaimovich (PQ)¹

¹Departamento de Bioquímica, Instituto de Química, Universidade de São Paulo São Paulo, Brasil, ²Universität Regensburg, Alemanha, ³Departamento de Química, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, Brasil.

*e-mail para contato: filipe.lima@usp.br

Palavras Chave: micela, especificidade iônica, simulação computacional.

Introdução

As propriedades de micelas catiônicas podem ser moduladas pela alteração do contra-íon do surfactante. Contra-íons com grupos hidrofóbicos volumosos apresentam interações com o núcleo hidrofóbico micelar, diminuindo o grau de dissociação, levando ao crescimento micelar e/ou separação de fase.^{1,2}

O íon trifluorometanosulfonato (triflato, Tf) possui alta afinidade por interfaces hidrofóbicas, provocando a diminuição na tensão superficial em soluções aquosas e induzindo separação de fase em sistemas micelares.³ Informações acerca da organização molecular do Tf nestes sistemas são difíceis de serem obtidas experimentalmente. A dinâmica molecular (DM) é uma ferramenta poderosa para a obtenção destas informações.^{4,5} No presente trabalho apresentamos resultados de simulações computacionais de agregados de DTATf e DTAB, que fornecem valiosas informações acerca da interação do íon triflato com interfaces.

Resultados e Discussão

As simulações foram realizadas com o pacote GROMACS, com o campo de força OPLS,⁶ no centro computacional da Technische Universität em Munique. A posição dos ânions na interface micelar foi calculada a partir das trajetórias das simulações computacionais. As funções de distribuição radial (RDF) a partir do centro de massa da micela para o átomo de nitrogênio da cabeça polar, para o centro de massa do triflato e para o brometo é mostrada abaixo.

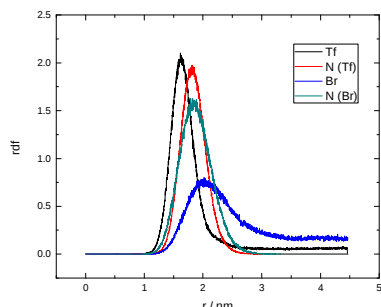


Figura 1. RDF x distância.

A RDF do nitrogênio (nos dois casos) apresenta um pico em aproximadamente 1,80 nm, enquanto a RDF do triflato apresenta um pico apenas, em 1,62 nm, mais próximo do centro da micela que as cabeças polares do surfactante. O brometo possui o pico em 2,01 nm.

A hidratação relativa das cadeias hidrofóbicas em micelas (comparando com a hidratação na solução) pôde também ser analisada, utilizando metodologia similar a descrita.⁵

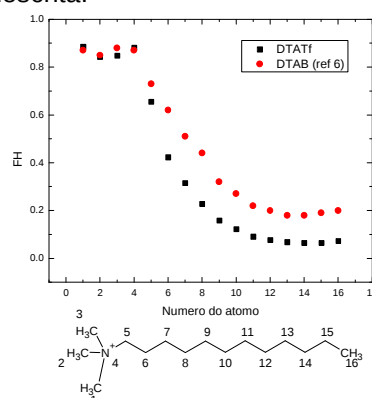


Figura 2. Hidratação residual em DTATf e DTAB.

A hidratação das cadeias de DTAB é maior que a apresentada pelo triflato em cerca de 20% para os carbonos da cadeia hidrofóbica.

Conclusões

A alta afinidade do triflato pela interface micelar, confirmada por cálculos de dinâmica molecular conduz a um maior empacotamento das cadeias e assim, à desidratação do interior da micela.

Agradecimentos

FAPESP, CAPES, CNPq

¹ Magid, L., et al; *J. Phys Chem B*; **1997**, 101, 7919.

² Bales, B.L., Zana, R.; *Langmuir*, **2004**, 20, 1579.

³ Lima, F.S. et al; *Langmuir*, **2011**, 27, 4319.

⁴ Pal, S. et al; *J Phys Chem B.*, **2005**, 109, 12879.

⁵ Stephenson, B.C., et al; *J Phys Chem B.*, **2007**, 111, 1063.

⁶ Canonigra Lopes, J.N.; Pádua, A.A.H.; *J Phys Chem B*, **2004**, 108, 16893.